

C₆₀ 重合膜の原子構造と電子輸送特性

Atomic configuration and transport property of electron-beam irradiated C₆₀ film

小野 倫也

Tomoya Ono

大阪大学大学院工学研究科

Graduate School of Engineering, Osaka University, Suita Osaka 565-0871

C₆₀ 堆積膜に電子線を照射すると、C₆₀ 同士が重合して導電性を持った C₆₀ ポリマーが形成される [1]。本研究では、我々が独自に開発した第一原理に基づくナノ構造体の電子状態・輸送特性計算プログラム [2] を用い、金属的な性質を示す菱面体晶構造の C₆₀ ポリマーの原子構造を探し出し、電子輸送特性を調べた [3]。図 1 に本研究で発見した金属的な電子状態を示す C₆₀ ポリマーの原子構造を示す。層内の C₆₀ は [2+2] の 4 員環結合で結ばれ、層同士は、重合前は隣り合う層の 6 員環が向き合った 3 つのダンベル型結合、重合後は 3 つのダンベル型結合のうち 1 つの 6 員環が解けたピーナツ型結合で結ばれている。これらのポリマーを dimer として切り出し、ダンベル型/ピーナツ型の結合構造の遷移が、C₆₀ 分子間の輸送特性に与える影響を調べた。図 2 に入射電子のエネルギーに対するコンダクタンスの変化を示す。フェルミ準位より少し上のピークは、C₆₀ 分子の 3 つの縮退した最低空軌道 t_{ul} によるものである。ピーナツ型に遷移すると、分子間結合が sp^3 軌道から sp^2 軌道に変わり、 t_{ul} 軌道から構成される準位がエネルギー的に分散するため、ピークが低くなる。また、結合状態の変化により、フェルミ準位よりも低い位置に新たな結合準位が生成されるため、ピーナツ型ではフェルミ準位よりも低いエネルギーでコンダクタンスが大きくなる。この結果、ピーナツ型ではダンベル型に比べコンダクタンススペクトルがなだらかになる。この結果は走査トンネル分光の実験結果とも一致しており、図 1(b) のモデルが金属的な性質を示す C₆₀ ポリマーの原子構造であると考えられる。

文献

- [1] J. Onoe *et al.*, Appl. Phys. Lett. **82**, 595 (2003).
- [2] K. Hirose, T. Ono, Y. Fujimoto, and S. Tsukamoto: *First-Principles Calculations in Real-Space Formalism* (Imperial College Press, London, 2005).
- [3] T. Ono and S. Tsukamoto, Phys. Rev. B **84**, 224424 (2011).

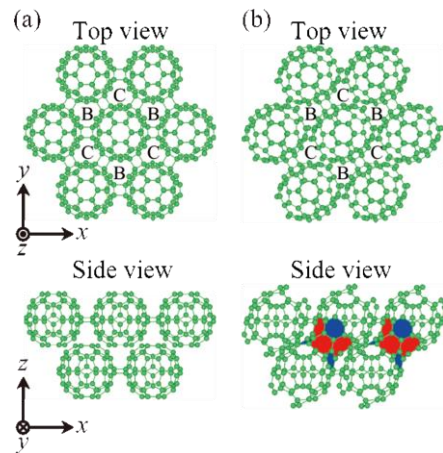


図 1 重合前の原子構造(a)と本研究で発見した金属的な電子状態を示す C₆₀ ポリマーの原子構造(b)。Top view の B、C は上層、下層の C₆₀ の位置である。

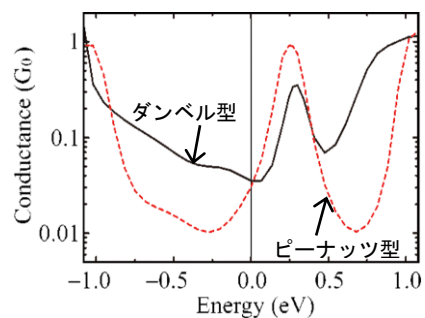


図 2 コンダクタンススペクトル。